

# 小世界网络上的扩散限制的聚集-湮没反应动力学\*

沈伟维 李萍萍 柯见洪<sup>†</sup>

(温州大学物理与电子信息工程学院,温州 325035)

(2009 年 12 月 6 日收到;2010 年 3 月 2 日收到修改稿)

通过 Monte-Carlo 模拟,研究了基于 NW 网络的两种类集团不可逆聚集-湮没过程的动力学行为.在系统中,两个同种类集团相遇,将不可逆地聚集成一个更大的集团;不同种类的两个集团相遇,则发生部分湮没反应.模拟结果表明,1)当捷径量化参数  $p$  相对较大或较小时,系统经较长时间演化后,集团密度  $c(t)$  和粒子密度  $g(t)$  呈现幂律形式,  $c(t) \propto t^{-\alpha}$  和  $g(t) \propto t^{-\beta}$ ,其中幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  满足  $\alpha = 2\beta$  的关系;2)当  $p$  为其他值时,集团密度和粒子密度随时按非严格的幂律形式演化.模拟结果与文献[10,11]的理论分析相符得很好.

**关键词:** 聚集-湮没过程,小世界网络,反应动力学, Monte-Carlo 模拟

**PACC:** 8220M,8235,7115Q

## 1. 引 言

1917 年 Smoluchowski 在平均场理论的基础上运用反应速率方程方法来研究简单聚集现象,解析地分析了不可逆聚集过程动力学行为<sup>[1]</sup>.该理论方法在聚集动力学研究领域得到了广泛的应用<sup>[2-4]</sup>.1983 年, Kang 等人研究了不可逆湮没  $A + B \rightarrow \text{inert}$  过程的动力学问题,其中  $A$  和  $B$  代表两种不同种类的集团<sup>[5,6]</sup>.在一些物理学、社会学、化学以及生物现象中,如聚合物的形成、星云分布、生物种群之间的竞争和正负电子的湮没等等<sup>[7-9]</sup>,不可逆聚集和湮没过程往往同时存在. Krapivsky 在 1993 年提出了两种类集团不可逆的聚集-湮没动力学模型:同种类集团相遇将发生不可逆聚集反应,而不同种类集团相遇将发生不可逆湮没反应;然后他采用速率方程方法详细地研究了各种参数条件下的聚集-湮没过程的动力学行为<sup>[10]</sup>.研究表明,在  $A$  和  $B$  两种集团初始密度相同的情况下,系统中剩余的  $A$  和  $B$  集团的大小分布满足传统的标度特性. Sokolov 等人采用 Monte-Carlo 模拟研究了低维规则网络上的不可逆聚集-湮没反应动力学过程,得到了集团密度  $c(t)$  和粒子密度  $g(t)$  遵循的规律:  $c(t) \propto t^{-\alpha}$  和  $g(t) \propto t^{-\beta}$ ,其中  $\alpha = 2\beta$ <sup>[11]</sup>.几十年来,不可逆聚集-湮没动力学得到了深入的研究,包括在平均场理论的基础

上计算反应速率,或者运用 Monte-Carlo 模拟来计算反应速率和相关参数<sup>[12-16]</sup>.结果表明,经长时间演化后,系统中剩余的集团数分布以及粒子数分布在长时间下随时间的变化具有一定的标度特性.

在已有的聚集-湮没动力学研究中,学者们都是运用平均场假设进行理论研究,或者基于规则网络进行计算机模拟.无论是理论研究或者是基于规则网络的计算机模拟,系统中的每一对集团相互反应都是等概率的.如果将动力学演化过程描述成网络,那么系统中的每个集团可以抽象成节点,两集团之间的联系(如反应等)可抽象为对应节点之间的连线(即边).还可以把系统中的集团所处的空间位置看做节点,两位置间的联系视为边.在已有的大部分研究中,聚集-湮没动力学过程大部分都被认为在随机网络或规则网络上进行的.

然而,在真实世界里,很多反应事件的联系往往出现小世界效应或者无标度效应.也就是说,系统中的集团不能被看成是完全等概率反应的,不仅是近邻集团之间可以反应,两个远程连接节点上的集团之间也可能存在反应.因此,真实世界里一些反应过程不能简单地被认为是在随机或规则空间里进行的,而应该被看成是发生在复杂网络(小世界或无标度网络等)上的动力学过程<sup>[17,18]</sup>.最近几年来,基于复杂网络的聚集-湮没动力学研究引起了广大国内外学者的兴趣. Catanzaro 等分别用理论计

\* 国家自然科学基金(批准号:10775104,10875086,10305009)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: kejianhong@yahoo.com.cn

算和计算机模拟研究了复杂网络上的扩散湮没 ( $A + A \rightarrow 0$ ) 体系的动力学行为, 得到平均场理论计算中, 系统中粒子的密度  $\rho(t)$  遵循  $1/\rho(t) \propto t$  的规律, 而在无标度网络中则与幂指数  $\gamma$  的大小有关<sup>[19]</sup>. Laguna 等研究了复杂网络上的静态二元湮没过程的粒子分布, 得到湮没的速率与网络的连通性有关, 连通性越高, 湮没反应越快<sup>[20]</sup>. Gallos 等采用 Monte-Carlo 模拟方法研究了无标度网络上的二元湮没反应 ( $A + A \rightarrow 0$  与  $A + B \rightarrow 0$ ) 体系, 得到了系统中粒子的密度  $\rho(t)$  在无标度网络幂指数不同的情况下随时间的分布规律<sup>[21,22]</sup>. 唐明等人采用平均场速率方程方法解析地研究了无标度网络上的零区域凝聚现象<sup>[23,24]</sup>. Hua 采用 Monte-Carlo 模拟方法研究了复杂网络上的质量守恒的迁移与扩散的机理, 得到集团大小分布随时间的演化规律等<sup>[25]</sup>. 我们采用无标度网络上的聚集体迁移动力学模型较好地解释了我国人口分布的演化规律<sup>[26,27]</sup>. 这些研究结果表明, 基于复杂网络的一些反应系统与基于正规空间的相同系统有着显著不同的动力学行为. 可见, 基于小世界网络的聚集-湮没动力学研究有着重要的研究价值, 它将有助于人们更深入地了解网络结构的拓扑特性对反应动力学的影响.

本文将采用 Monte-Carlo 模拟方法研究基于小世界网络的不可逆聚集-湮没模型的动力学行为. 1998 年, Watts 和 Strogatz 引入了小世界网络模型 (WS 模型): 在低维的规则网络上, 通过随机断边重连得到小世界网络<sup>[28]</sup>. WS 小世界网络既有较短的平均最短路径又具有较高的聚集系数, 但是 WS 小世界网络中的随机化重连有可能破坏网络的连通性. Newman 和 Watts 提出另一种构造算法 (NW 模型): 在规则网络上随机加边来构造小世界网络, 从而不会破坏网络的连通性<sup>[29]</sup>. 此外, 在一些实际过程中, 聚集集团的扩散 (迁移) 速率往往与其大小 (质量) 有关. 一般而言, 质量较大的集团的迁移速率相对较小, 而质量较小的集团的迁移速率则相对较大. 因此, 本文引入扩散系数  $D$  来表征集团迁移速率对集团质量的依赖关系. 通常, 扩散系数  $D$  与集团质量  $m$  的关系为  $D \propto m^{-q}$ ,  $q$  越大,  $D$  越小, 质量大的集团越难发生迁移. Sokolov 等人研究了  $q = 1$  和  $q = 2$  情况下不可逆聚集-湮没反应系统的动力学演化行为, 发现幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  随着指数  $q$  的增大而减小<sup>[11]</sup>. 可见, 集团扩散速率对集团质量的依赖性将影响不可逆聚集-湮没过程演化进程. 在本文中,

我们主要研究基于 NW 小世界网络上的扩散限制聚集-湮没演化动力学过程. 结果表明, 基于小世界网络的不可逆聚集-湮没动力学行为演化与规则网络上的有所区别, 且这种变化随着小世界网络的平均最短路径不同而不同.

## 2. 基于 NW 小世界网络的聚集-湮没动力学模型

首先构造一个含有  $N$  个节点的一维环状规则网络, 其中每个节点都与它左右相邻的一个节点相连 (本文中, 网络大小为  $N = 10^4$ ), 如图 1 所示. 保持规则网络原有的边不变, 在随机选取的两节点之间建立若干新的连边, 可称为“捷径”. 规定任意两个节点之间最多只能有一条边 (包括捷径) 存在, 且每一个节点都不能与自身相连. 为了量化所加边的数目的多少以及讨论问题的方便, 我们引入捷径量化参数  $p$ . 定义  $p = \frac{N_{\text{add}}}{N}$ , 其中  $N_{\text{add}}$  为所加边的总条数 (即捷径的数目),  $N$  为原规则网络边的总条数. 规定参数  $p$  的取值范围在  $0 \leq p \leq 1$ , 也就是说最多能添加的捷径数等于原规则网络边的数目. 如果要使网络全连通, 需要新添加的边数  $\propto N^2$ , 所以相对来说, 即使在  $p = 1$  的情况下, 添加的边数还是很少, 但是网络的结构性质已经随着  $p$  的改变而有较大的影响.

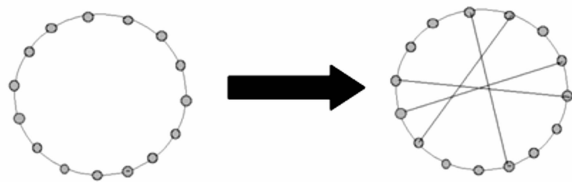


图 1 NW 小世界网络模型

NW 小世界网络模型中, 随着捷径量化参数  $p$  的增加, 网络的平均最短路径将随之减小.  $p$  与网络平均最短路径  $L(p)$  的关系, 如图 2 所示. 为了更直观地显示捷径量化参数  $p$  对网络平均最短路径的影响, 图 2 的纵坐标采用了无量纲的  $L(p)/L(0)$ .

由图 2 可见, 随机化加边使平均最短路径减小. 当  $0 \leq p \leq 0.01$  时, 平均最短路径减小得很快. 当  $p > 0.01$  时, 平均最短路径变化缓慢; 并且当  $p$  增大到一定程度时, 随机加边带来的捷径数目对网络而言已足够多, 继续添加随机边对平均最短路径的贡

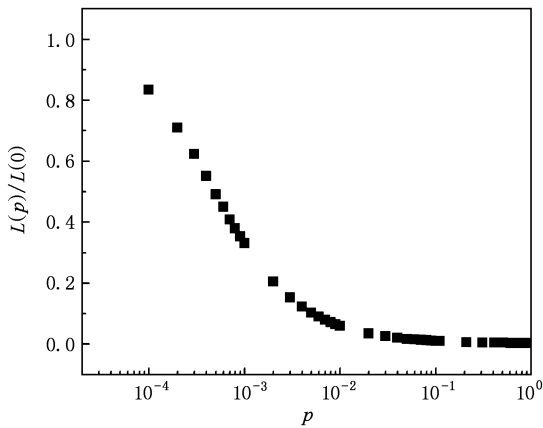
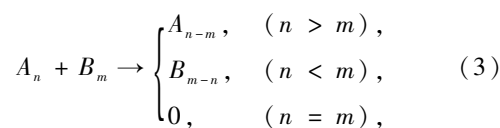


图2 平均最短路径  $L(p)/L(0)$  与捷径量化参数  $p$  的关系曲线

献甚微,于是平均最短路径趋于稳定。

下文中,将讨论捷径量化参数  $p$  对扩散限制的聚集-湮没动力学行为的影响。对于每一个节点,在初始时刻都含有三种可能的态: $n$ 、 $-m$  和  $0$ 。节点处于  $n$  态表示该节点被  $n$  个  $A$  种类粒子同时占据,节点处于  $-m$  态表示该节点被  $m$  个  $B$  种类粒子同时占据,而节点处于  $0$  态表示没有粒子占据该节点(即空节点)。占据在同一个节点上的所有粒子组成一个集团。在初始时刻, $A, B$  两种集团具有相同的粒子个数(本文中, $A, B$  两种粒子数分别为  $10^3$ )。网络上的聚集-湮没动力学演化包括以下四个步骤:1) 随机选择一个节点  $i$ ,且  $i$  节点上必须有粒子存在;2) 随机选择一个与  $i$  节点有边相连的相邻节点  $j$ ;3)  $i$  节点上的全部粒子以速率  $m^{-q}$  迁移到  $j$  节点上,其中  $m$  为  $i$  节点上的粒子数(本文中, $m$  又称为占据在  $i$  节点上的集团的质量),指数  $q$  则表征集团扩散速率对集团质量的依赖程度;4) 如果节点  $j$  为空节点,则粒子占据  $j$  节点;如果  $j$  节点已有粒子,则将遵循 Krapivsky 提出的聚集-湮没反应机理<sup>[10]</sup>,如下述反应式所示:



其中  $A_n$  代表具有  $n$  个  $A$  种类粒子的集团, $B_n$  代表具有  $n$  个  $B$  种类粒子的集团。反应式(1)描述两个  $A$  种类集团相遇后自发地聚合成一个更大的  $A$  种类集团;相应地,反应式(2)描述两个  $B$  种类集团相遇后自发地聚合成一个更大的  $B$  种类集团。反应式

(3)描述含有  $n$  个  $A$  种类粒子的集团与含有  $m$  个  $B$  种类粒子的集团相遇后一对一相互湮没,形成含有  $|n - m|$  个粒子的集团。当反应物  $A$  种类粒子多于  $B$  种类粒子时,产物为  $A$  集团;当反应物  $B$  种类粒子多于  $A$  种类粒子时,产物为  $B$  集团;当两种集团粒子数相同时,则相互完全湮没。

### 3. 模拟结果与分析

#### 3.1. 集团扩散速率与集团质量无关的聚集-湮没过程

为了考察网络结构对不可逆聚集-湮没动力学的影响,我们首先讨论集团扩散速率与集团质量无关(即  $q = 0$ )情况下的系统演化行为。图3所示的是在不同的捷径量化参数  $p$  的情况下,集团密度  $c(t)$  与时间  $t$  的关系图(这里, $c(t)$  = 集团数/网络节点数)。同时,令粒子密度  $g(t)$  = 粒子数/网络节点数,也得到了粒子密度  $g(t)$  随时间  $t$  的演化曲线,如图4所示。

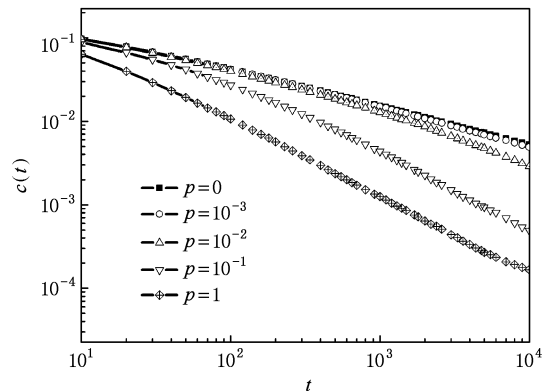


图3  $q = 0$  系统的集团密度  $c(t)$  随时间  $t$  的变化曲线

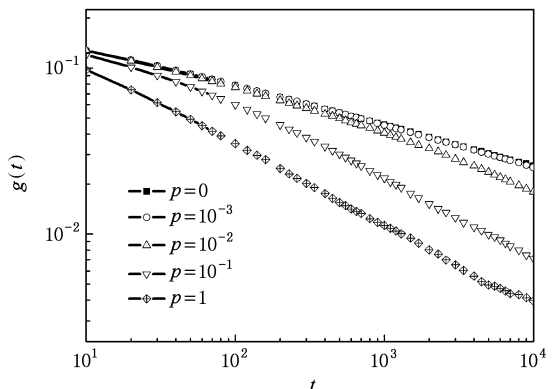


图4  $q = 0$  系统的粒子密度  $g(t)$  随时间  $t$  的变化曲线

Sokolov 等人的研究表明,基于规则网络( $p=0$ )的聚集-湮没过程中,集团密度  $c(t)$  和粒子密度  $g(t)$  都与反应时间具有幂律函数关系<sup>[11]</sup>;然而,对于复杂网络( $p>0$ )上的聚集-湮没过程,只有在  $p$  较小或较大的情况下,集团密度和粒子密度与时间呈幂律关系,即  $c(t) \propto t^{-\alpha}$  和  $g(t) \propto t^{-\beta}$ ;而在其他情况下,集团密度和粒子密度近似地随时间按幂律函数

形式演化(见图 3 和图 4). 为了深入地分析随机添加的捷径(或捷径量化参数  $p$ )对不可逆聚集-湮没反应动力学演化的影响,我们分别给出了不同捷径量化参数  $p$  所对应的反应中期与中后期的幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值,如表 1 所示. 表 1 中的反应中期所指的时间段为 100—1000, 而反应中后期所指的时间段为 1000—10000.

表 1 反应中期与中后期的幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值

$p$	$\alpha$		$\beta$	
	中期	中后期	中期	中后期
0	$0.45457 \pm 0.00009$	$0.4661 \pm 0.0004$	$0.2441 \pm 0.0001$	$0.2471 \pm 0.0002$
0.0005	$0.4568 \pm 0.0001$	$0.4727 \pm 0.0002$	$0.2444 \pm 0.0001$	$0.2480 \pm 0.0001$
0.001	$0.4677 \pm 0.0003$	$0.4757 \pm 0.0004$	$0.2527 \pm 0.0002$	$0.2511 \pm 0.0002$
0.005	$0.4941 \pm 0.0002$	$0.5379 \pm 0.0009$	$0.2659 \pm 0.0001$	$0.2824 \pm 0.0002$
0.01	$0.53326 \pm 0.00004$	$0.607 \pm 0.002$	$0.29062 \pm 0.0001$	$0.3189 \pm 0.0003$
0.05	$0.76944 \pm 0.00009$	$0.905 \pm 0.003$	$0.4154 \pm 0.0005$	$0.4669 \pm 0.0007$
0.1	$0.881 \pm 0.001$	$0.95312 \pm 0.00007$	$0.4739 \pm 0.0004$	$0.5000 \pm 0.0007$
0.3	$0.93688 \pm 0.00006$	$0.95551 \pm 0.00009$	$0.4877 \pm 0.0003$	$0.4982 \pm 0.0007$
0.5	$0.9500 \pm 0.0008$	$0.952 \pm 0.001$	$0.4880 \pm 0.0005$	$0.4840 \pm 0.0004$
1.0	$0.9467 \pm 0.0006$	$0.9391 \pm 0.001$	$0.4863 \pm 0.0003$	$0.4888 \pm 0.0004$

由表 1 可见,随着捷径量化参数  $p$  的增大,幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值增大. 此外,与规则网络上的聚集-湮没过程相一致,<sup>[11]</sup>小世界网络上的聚集-湮没系统的幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值也满足  $\alpha = 2\beta$  的标度关系. 这表明,网络结构的改变仅影响了聚集-湮没反应系统的演化速率,并不会影响系统的标度性质. 比较表 1 中不同反应时期的幂指数的大小,我们发现:1)  $p$  较大或较小时,两个反应时间的幂指数  $\alpha(\beta)$  近似相同,这进一步表明经较长时间演化后系统中的集团密度和粒子密度与时间满足严格幂律关系;2)  $p$  为其他值时,反应中后期的幂指数  $\alpha(\beta)$  值略大于反应中期相应的  $\alpha(\beta)$  值,即集团密度和粒子密度随时间的演化呈现非严格的幂律形式. 由此可见,随机加边带来的捷径在不同反应时期对聚集-湮没反应系统的演化有着不同的影响.

因为随机化加边会导致网络结构发生改变,而平均最短路径是网络结构的一个重要特征. 图 5 所示的是反应中期与中后期的幂指数  $\alpha$  随平均最短路径  $L$  变化的曲线.

由图 5 可见,当平均最短路径  $L$  较大(对应的  $p$  值约小于 0.001)时,中期与中后期相对应的幂指数  $\alpha$  值大致相同( $\alpha$  约为 0.46),且都近似地与  $L$  无关.

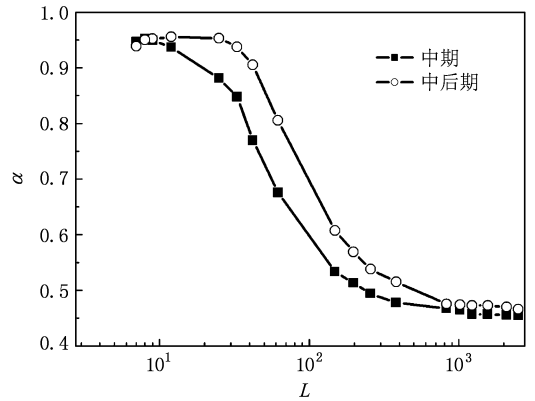


图 5 不同时间段的幂指数  $\alpha$  随平均最短路径  $L$  的变化曲线

这进一步表明,在捷径量化参数  $p$  较小的情况下,集团密度和粒子密度随时间按幂律函数形式演化. 此外,当  $p$  较小时,虽然小世界网络的平均最短路径相对于  $p=0$  情况(即规则网络)减小得很多,但由于网络中实际捷径数(共  $pN$  条)相对较少,集团选择这些捷径作为反应通道的概率也相应地非常小,即随机添加的少量边对聚集-湮没过程的反应历程影响很小. 因此, $p$  较小时,基于 NW 网络的聚集-湮没系统中集团密度与粒子密度随时间演化规律类似

于  $p=0$  (即规则网络) 的情况. 随着  $p$  增大, 网络中的捷径不断增多, 则某集团经由这些捷径遇到另一个集团并发生聚集或湮没反应的概率随之增大. 因此, 系统演化速率将随  $p$  增大而不断加快, 即幂指数  $\alpha$  值不断增大. 当  $p$  增大到一定值后 (对应的  $p$  值约为 0.3), 随机加边带来的关键捷径已经足够多, 相应地, 网络的平均最短路径已经很小, 并趋于某稳定值. 因此, 当  $p$  大于某一定值时, 幂指数将趋于稳定值 (最大值):  $\alpha$  约为 0.95.

Sokolov 等人采用标度方法得到了幂指数  $\alpha$  与正规空间维度  $d$  的关系<sup>[11]</sup>,

$$\alpha = \begin{cases} 2d/(4 + qd), & d \leq 2, \\ 2/(2 + q), & d > 2. \end{cases} \quad (4)$$

在集团扩散系数与集团质量无关 (即  $q=0$ ) 的情况下,  $\alpha = d/2$  ( $d \leq 2$ ) 和  $\alpha = 1$  ( $d > 2$ ). 可见, 幂指数  $\alpha$  先随着反应系统所处空间的维度  $d$  增大而增大, 当维度  $d=2$  时  $\alpha$  达到上界值 ( $\alpha_{\max} = 1$ ). 很显然, 随着捷径量化参数  $p$  的增大, NW 网络的空间维度将随之增大, 因此幂指数  $\alpha$  随着  $p$  增大而增大; 当 NW 网络的空间维度增大到 2 之后,  $\alpha$  值不再随  $p$  值增大而进一步增大, 即  $\alpha_{\max} \approx 0.95$ . 本文的模拟结果与理论分析定性相符. 此外, Sokolov 等人还指出,<sup>[11]</sup> 系统所处的空间维度  $d < 2$  时, 聚集-湮没反应速率受控于集团随机行走的紧密度, 即与集团所在的格点彼此间的连通性有关. 当捷径量化参数  $p$  较小 (即对应的网络空间维度小于 2) 时, 1) 在反应初期, 系统中的集团浓度较大, 集团更多地经由近邻边与另一近邻集团发生反应, 即加边带来的捷径对集团随机行走的紧密度影响较小; 2) 在反应后期, 由于聚集或湮没反应, 系统中的集团浓度越来越小, 这时捷径对集团随机行走起到相对更大的作用. 因此, 反应初期阶段的幂指数值将接近基于相对更低维度的 NW 网络的反应系统所对应的  $\alpha$  值 (即  $\alpha$  值偏小), 而反应后期阶段的幂指数  $\alpha$  值将大于反应初期的  $\alpha$  值 (如图 5 所示). 这个模拟结果进一步佐证了 Sokolov 等人的理论分析的正确性.

另一方面, 基于平均场的理论计算结果表明, 当  $t \gg 1$  时,  $c(t) \propto t^{-1}$  和  $g(t) \propto t^{-1/2}$ <sup>[10,30]</sup>. 可见, 捷径量化参数  $p$  增大到约 0.3 (即相应的网络空间维度为 2) 后, NW 网络上的扩散限制聚集-湮没动力学行为将近似地等价于完全随机空间里的反应限制聚集-湮没行为.

### 3.2. 集团扩散速率依赖于集团质量的聚集-湮没过程

接下来, 我们讨论不可逆聚集-湮没反应过程中集团的扩散与集团质量有关的情况. 假定集团所包含的粒子数越多、指数  $q$  越大, 集团将越难发生迁移, 从而扩散速率减慢, 即扩散速率  $D$  与集团的质量  $m$  满足  $D \propto m^{-q}$  的关系. 本文的模拟结果表明, 不同  $q$  值 ( $q > 0$ ) 所对应的反应系统有着类似的动力学行为. 这里, 我们仅详细地分析  $q=1$  情况下系统的演化动力学.

在不可逆聚集-湮没反应过程中, 集团的扩散速率与其所包含的粒子数  $m$  成反比, 而且所有集团的粒子数  $m \geq 1$ . 因此, 与上述的  $q=0$  情况相比,  $q > 0$  情况下的系统的演化速率更加缓慢.

Sokolov 等人的研究表明, 当  $q=1$  时, 基于规则网络 ( $p=0$ ) 的聚集-湮没过程中, 集团密度  $c(t)$  和粒子密度  $g(t)$  都与反应时间具有幂律函数关系<sup>[11]</sup>. 由图 6 和图 7 可见, 对于 NW 网络上的聚集-

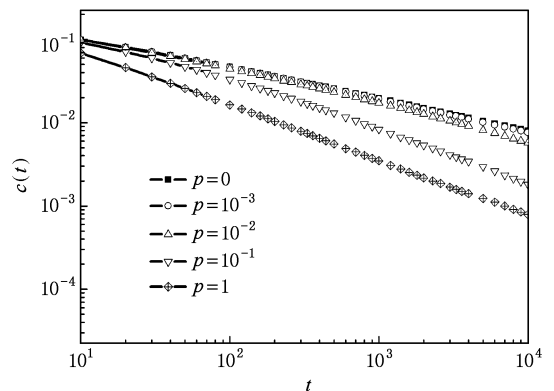


图 6  $q=1$  系统的集团密度  $c(t)$  随时间  $t$  的变化曲线

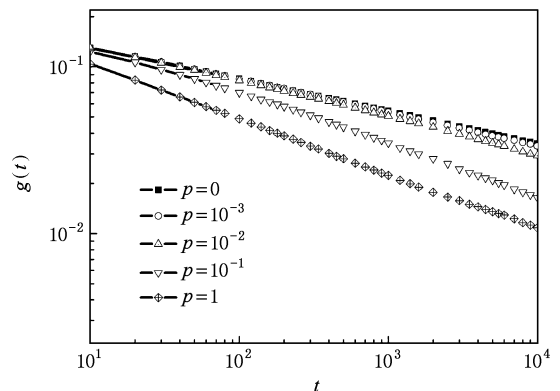


图 7  $q=1$  系统的粒子密度  $g(t)$  随时间  $t$  的变化曲线

湮没过程,只有在  $p$  较小或较大的情况下,集团密度和粒子密度才随时间按幂律函数形式演化;其他情况下集团密度和粒子密度近似地随时间按幂律函数形式演化. 表 2 给出在不同捷径量化参数  $p$  的情况下反应中期和中后期幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值. 由表 2

表 2  $q = 1$  时不同捷径量化参数  $p$  对应的幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值

$p$	$\alpha$		$\beta$	
	中期	中后期	中期	中后期
0	$0.3870 \pm 0.0002$	$0.3888 \pm 0.0002$	$0.1994 \pm 0.00001$	$0.1994 \pm 0.0001$
0.0005	$0.3870 \pm 0.0001$	$0.3949 \pm 0.0002$	$0.1990 \pm 0.0007$	$0.2016 \pm 0.0002$
0.001	$0.3911 \pm 0.0003$	$0.3989 \pm 0.0003$	$0.2012 \pm 0.0002$	$0.2029 \pm 0.0002$
0.005	$0.4079 \pm 0.0003$	$0.4253 \pm 0.0004$	$0.2120 \pm 0.0002$	$0.2193 \pm 0.0003$
0.01	$0.4284 \pm 0.0003$	$0.4675 \pm 0.0008$	$0.2218 \pm 0.0001$	$0.2345 \pm 0.0003$
0.05	$0.5619 \pm 0.0007$	$0.618 \pm 0.001$	$0.2848 \pm 0.0005$	$0.3110 \pm 0.0006$
0.1	$0.6369 \pm 0.0003$	$0.6588 \pm 0.0005$	$0.3154 \pm 0.0001$	$0.3332 \pm 0.0005$
0.3	$0.6640 \pm 0.0003$	$0.6513 \pm 0.0005$	$0.3307 \pm 0.0004$	$0.3297 \pm 0.0006$
0.5	$0.6650 \pm 0.0003$	$0.6602 \pm 0.0004$	$0.3344 \pm 0.0002$	$0.3230 \pm 0.0004$
1.0	$0.6667 \pm 0.0003$	$0.6617 \pm 0.0004$	$0.3302 \pm 0.0004$	$0.3319 \pm 0.0002$

同时,我们也给出反应中期和中后期的幂指数  $\alpha$  与平均最短路径  $L$  的关系曲线,如图 8 所示. 由图 8 可见,1)当  $p$  较小时,平均最短路径  $L$  较大,中期与中后期的幂指数  $\alpha$  值大致相同(约为 0.4);2)当  $p$  较大时,平均最短路径  $L$  较小,幂指数  $\alpha$  值趋于稳定值(约为 0.66). 此外,反应中期的幂指数  $\alpha$  值略小于反应中后期相应的  $\alpha$  值. 由此可见, $q = 1$  情况下幂指数随平均最短路径的演化规律  $\alpha(L)$  与  $q = 0$  情况下的  $\alpha(L)$  相似.

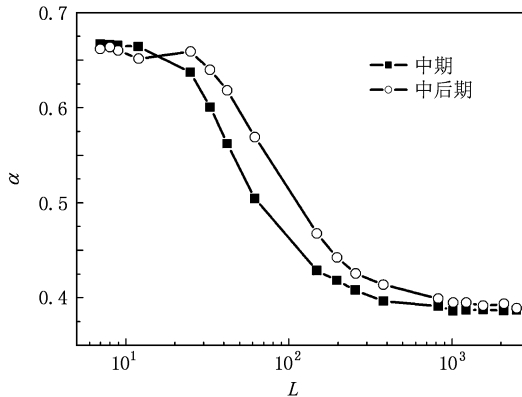


图 8 不同反应时间段的幂指数  $\alpha$  值与平均最短路径  $L$  的关系曲线

可见,当  $q = 1$  时,随着  $p$  的增大,幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值增大;且幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值均满足  $\alpha = 2\beta$  的关系. 此外,比较表 1 与表 2 的数据进一步表明,幂指数  $\alpha$  定性地满足理论关系式  $\alpha = 2d/(4 + qd)$  ( $d \leq 2$ ) 和  $\alpha = 2/(2 + q)$  ( $d > 2$ ).

应的幂指数  $\alpha(L; q)$ , 如图 9 所示. 由图 9 可见,在平均最短路径  $L$  相同的情况下,幂指数  $\alpha$  值随着  $q$  值增大而减小. 此外,随着平均最短路径的减小(相应地,网络空间维度增大),不同  $q$  值所对应的幂指数之间的差值随之增大. 这表明,在聚集-湮没反应历程中,体系所处网络的拓扑结构特性和集团扩散速率对集团质量的依赖性扮演着同样重要的角色.

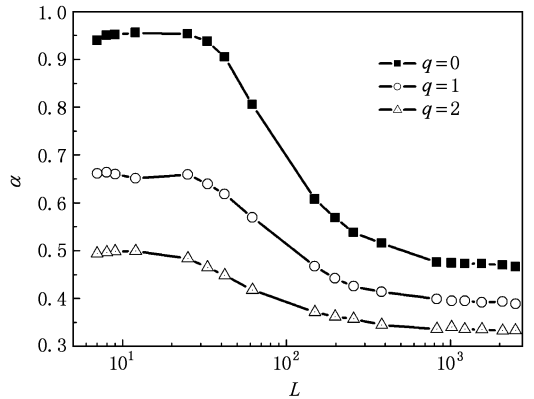


图 9 反应后期的幂指数  $\alpha$  随平均最短路径  $L$  和扩散指数  $q$  的变化曲线

为了便于与理论公式(4)进行比较,我们绘制了  $1/\alpha$  与平均最短路径  $L$  之间的关系曲线(见图 10). 非常明显,一组不同  $q$  值的  $1/\alpha \propto L$  关系曲线

我们还比较了相同的初始条件下不同  $q$  值所对

彼此间近似地平行. 图 10 的内插图进一步表明,  $1/\alpha - q/2$  的值近似地与  $q$  无关. 因此, 我们的模拟结果半定量半定性地验证了文献 [11] 的理论分析.

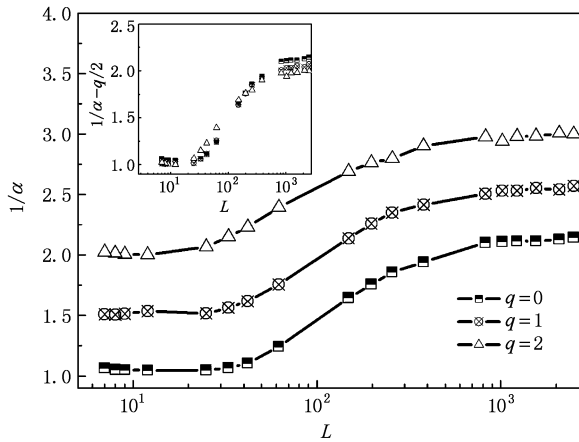


图 10  $1/\alpha$  随平均最短路径  $L$  和扩散指数  $q$  的变化曲线

## 4. 结 论

本文采用 Monte Carlo 模拟方法研究了基于 NW 网络的两种类粒子不可逆聚集-湮没反应动力学行为, 并着重分析了反应过程中集团密度  $c(t)$  和粒子密度  $g(t)$  随时间的演化规律. 反应体系包含两种不同种类集团: A 和 B 集团. 同种类集团相遇后发生不可逆聚集反应, 而不同种类集团相遇后将发生湮没反应. 此外, 集团在 NW 网络上的扩散速率与集团的质量  $m$  有关, 其扩散系数  $D \propto m^{-q}$ .

本文分别模拟了在捷径量化参数  $p = 0-1$  以及

指数  $q = 0, 1$  和 2 情况下基于 NW 网络的聚集-湮没反应过程. 模拟结果表明, 1) 当  $p$  相对较大或较小时, 系统经较长时间演化后, 集团密度  $c(t)$  和粒子密度  $g(t)$  随时间的演化将遵循幂律形式,  $c(t) \propto t^{-\alpha}$  和  $g(t) \propto t^{-\beta}$ , 其中幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  满足  $\alpha = 2\beta$  的关系; 2) 当  $p$  为其他值时, 集团密度和粒子密度随时间接近似的幂律变化, 即反应中后期的幂指数  $\alpha(\beta)$  值略大于反应中期相应的  $\alpha(\beta)$  值. 此外, 研究结果还表明, 当平均最短路径  $L$  较大时, 幂指数  $\alpha$  将在一定  $L$  值范围内保持一个较小的数值 (即基于一维环状规则网络的聚集-湮没反应系统所对应的幂指数值); 然后  $\alpha$  随着  $L$  的减小逐渐增大, 并在  $L$  减小到一定值之后,  $\alpha$  将保持另一个不变值 (即二维及以上规则网络上的聚集-湮没反应系统所对应的幂指数值). 文献 [10, 11] 的研究表明, 如果反应系统所处的空间的维度  $d$  大于临界维度  $d_c$  (二维), 则反应物浓度的空间涨落可以忽略不计, 于是可以采用平均场近似方法足够精确地研究扩散限制的反应动力学过程; 换言之, 当  $d > d_c$  时, 幂指数  $\alpha$  和  $\beta$  的大小将与 NW 网络的空间维度无关. 很显然, NW 网络的空间维度随着平均最短路径  $L$  的减小而增大. 当 NW 网络的捷径量化参数  $p$  由 0 逐渐增大时, 其平均最短路径  $L$  相应地减小. 因此, 当  $p$  增大到某一数值, NW 网络的空间维度将达到不可逆聚集-湮没反应系统的动力学演化方式发生转变的临界维度 (二维), 幂指数  $\alpha$  将相应地达到最大值, 然后  $\alpha$  值不再随  $p$  继续增大而变化 (即保持该最大值). 本文的模拟结果与文献 [10, 11] 的理论分析相符得很好.

[1] Smoluchowski M V 1917 *Z. Phys. Chem.* **92** 129  
 [2] Family F, Landau D P 1984 *Kinetics of aggregation and gelation* (New York: Elsevier Science Publishing)  
 [3] Ernst M H, Hendriks E M, Ziff R M 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** 743  
 [4] Ziff R M, Ernst M H, Hendriks E M 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** 2293  
 [5] Kang K, Redner S 1985 *Phys. Rev. A* **32** 435  
 [6] Kang K, Redner S 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 955  
 [7] Vicsek T 1992 *Fractal growth phenomena* (Singapore: World Scientific)  
 [8] Toussaint D, Wilcek F 1983 *J. Chem. Phys.* **78** 2642  
 [9] Zumofen G, Blumen A, Klafter J 1985 *J. Chem. Phys.* **82** 3198  
 [10] Krapivsky P L 1993 *Physica A* **198** 135

[11] Sokolov I M, Blumen A 1994 *Phys. Rev. E* **50** 2335  
 [12] Ben-Naim E, Krapivsky P L 1995 *Phys. Rev. E* **52** 6066  
 [13] Argyrakis P, Kopelman R 1993 *Phys. Rev. E* **47** 3757  
 [14] Privman V, Cadilhe A M R, Glasser M L 1996 *Phys. Rev. E* **53** 739  
 [15] Kwon S, Kim Y 2009 *Phys. Rev. E* **79** 041132  
 [16] Frachebourg L, Krapivsky P L, Redner S 1998 *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** 2791  
 [17] Albert R, Barabási A L 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 47  
 [18] Dorogovtsev S N, Mendes J F F 2002 *Adv. Phys.* **51** 1079  
 [19] Catanzaro M, Boguñá M, Pastor-Satorras R 2005 *Phys. Rev. E* **71** 056104  
 [20] Laguna M F, Aldana M, Larralde H, Parris P E, Kenkre V M 2005 *Phys. Rev. E* **72** 026102

- [21] Gallos L K, Argyrakis P 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 138301
- [22] Gallos L K, Argyrakis P 2007 *J. Phys. : Condens. Matter* **19** 065123
- [23] Tang M, Liu Z, Zhou J 2006 *Phys. Rev. E* **74** 036101
- [24] Liang X M, Ma L J, Tang M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 83 (in Chinese) [梁小明、马丽娟、唐明 2009 物理学报 **58** 83]
- [25] Hua D Y 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 018901
- [26] Ke J, Lin Z, Zheng Y, Chen X, Lu W 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 028301
- [27] Shi H P, Ke J H, Sun C, Lin Z Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1 (in Chinese) [施华萍、柯见洪、孙策、林振权 2009 物理学报 **58** 1]
- [28] Watts D J, Strogatz S H 1998 *Nature (London)* **393** 440
- [29] Newman M E J, Watts D J 1999 *Phys. Rev. E* **60** 7332
- [30] Krapivsky P L 1993 *Physica A* **198** 150

## Kinetics of diffusion-limited aggregation-annihilation processes on small-world networks\*

Shen Wei-Wei Li Ping-Ping Ke Jian-Hong<sup>†</sup>

(College of Physics and Electronic Information Engineering, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China)

(Received 6 December 2009; revised manuscript received 2 March 2010)

### Abstract

Kinetics of diffusion-limited aggregation-annihilation processes on NW small-world networks is investigated by Monte Carlo simulation. In the system, if two clusters of the same species meet at the same node, they will aggregate and form a large one; while if two clusters of different species meet at the same node, they will annihilate each other. Simulation results show that, if the value of  $p$  (a parameter that quantifies the number of shortcuts) is large or small enough, the concentration of clusters  $c(t)$  and the concentration of particles  $g(t)$  follow power laws at large times, i. e.  $c(t) \propto t^{-\alpha}$  and  $g(t) \propto t^{-\beta}$ . Moreover, the relation between the exponents  $\alpha$  and  $\beta$  is found to satisfy  $\alpha = 2\beta$ . However, if  $p$  is of medium value, the concentration of clusters and the concentration of particles do not follow the power laws exactly. Our simulation results agree with the reported theoretical analysis very well.

**Keywords:** aggregation-annihilation processes, small-world network, kinetic behavior, Monte Carlo simulation

**PACC:** 8220M, 8235, 7115Q

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10775104, 10875086 and 10305009).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: kejianhong@yahoo.com.cn